

Supporting Information for:

Design of Coupled Porphyrin Chromophores with Unusually Large Hyperpolarizabilities

Nan Jiang¹, Gérard Zuber¹, Shahar Keinan¹, Animesh Nayak^{1,3}, Weitao Yang^{*1},

Michael J. Therien^{*1}, David N. Beratan^{*1,2,4}

¹Department of Chemistry, Duke University, Durham, NC 27708

²Department of Biochemistry, Duke University, Durham, NC 27708

³Department of Chemistry, University of Pennsylvania, Philadelphia, PA 19104

⁴Department of Physics, Duke University, Durham, NC 27708

Reference (37):

Clays, K.; Wostyn, K.; Olbrechts, G.; Persoons, A.; Watanabe, A.; Nogi, K.; Duan, X.-M.; Okada, S.; Oikawa, H.; Nakanishi, H.; Vogel, H.; Beljonne, D.; Bredas, J. L. *J. Opt. Soc. Am. B* **2000**, *17*, 256-265.

Reference(62):

Odom, S. A.; Webster, S.; Padilha, L. A.; Peceli, D.; Hu, H.; Nootz, G.; Chung, S. J.; Ohira, S.; Matichak, J. D.; Przhonska, O. V.; Kachkovski, A. D.; Barlow, S.; Brédas, J. L.; Anderson, H. L.; Hagan, D. J.; Van Stryland, E. W.; Marder, S. R. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 7510-7511.

Reference (100):

(100) Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, Jr., J. A.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, N. J.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. In *Gaussian 09*; Revision A.1; Gaussian, Inc.: Wallingford CT, 2009.